

分子動力学シミュレーションを用いたマイクロトラ イボロジー現象解析に関する基礎研究

著者	佐々木 直哉
号	1634
発行年	1995
URL	http://hdl.handle.net/10097/10441

氏 名	佐々木 直哉
授与学位	博士（工学）
学位授与年月日	平成 7 年 12 月 13 日
学位授与の根拠法規	学位規則第 4 条第 2 項
最終学歴	昭和 57 年 3 月 東北大学大学院工学研究科機械工学専攻前期課程修了
学位論文題目	分子動力学シミュレーションを用いたマイクロトライボロジー 現象解析に関する基礎研究
論文審査委員	東北大学教授 大宮司久明 東北大学教授 加藤 康司 東北大学教授 坂 真澄

論文内容要旨

第 1 章 序 論

トライボロジーは摩擦、摩耗、潤滑を総合的に扱う科学技術分野であり、機械に高い信頼性が要求される昨今において、この分野は急速に発展してきた。特に、磁気ディスクやマイクロマシン等に見られるように、装置の微小化、高速回転が進む中で原子レベルのアプローチによる摩擦・摩耗現象の解明を目的とする。いわゆるマイクロトライボロジーの分野研究は、なぜ摩擦力が発生するのかという基本的問題に端を発し、最近の実験・計測技術の進歩とともに盛んになってきた。このマイクロトライボロジーの世界では、従来ではほとんど無視されていた表面の分子間力や微小な摩耗などが現象を大きく左右することになる。ここでは、材料の変形や破壊、潤滑膜の挙動など、バルクの連続体モデルを基礎にした従来の連続体におけるトライボロジーの考え方だけでは対応しきれないものになり、古典力学的手法では説明困難な原子、分子レベルにまで立ち入る必要が出てくる。

原子、分子レベルからのアプローチの一つとして、STM (Scanning Tunnel Microscope) や、AFM (Atomic Force Microscope) 等に代表される計測技術がある。この方法では、マクロな領域での In-Situ な手法が最近盛んに研究されているが、磁気ディスクのように高速に運動している場合には、原子のダイナミックな挙動を観察することは現状では困難である。このような場合には、原子の高速挙動を時間を追って解析できる分子動力学が一つの有力な手法となる。分子動力学を用いたトライボロジーの研究はいくつかあるが、原子レベルから設計に有効なマイクロ摩擦モデルを構築するために必要と考えられる。摩擦の源である熱の散逸と摩擦力の関係や、その従来からのマクロモデルとの対比、摩擦面に介在する膜の影響の解析、原子スケールの変形・破壊の詳細な分析、などに関する研究はほとんど見当たらない。

本論文では、上記の背景において、分子動力学手法によるシミュレーション技術を用いた計算機実験により、まだ計測が困難な真実接触部におけるミクロな摩擦、摩耗現象を、原子レベルでダイナミックに調べることにより、摩擦、摩耗発生メカニズムを解明することと、摩擦面設計に有効なマイクロ摩擦モデルを構築するための普遍的な知見を得ることで、原子レベルの計算において従来検討されていなかった以下のことを明らかにする。

- (1) 真実接触部での摩擦、摩耗における原子レベルの変形、破壊形態
- (2) 真実接触部でのマクロモデルの検証
- (3) 熱の散逸による物理的な摩擦力発生検証とその見直し

(4) 摩擦力、摩擦係数の現象論的統一モデルの構築

なお、トライボロジーの現象を原子、分子レベルから捉える視点としては、原子の質点系力学を基礎とする物理的な視点と化学反応を考慮する化学的な視点の2つがあるが、本論文では物理的な視点のみ扱うこととする。ここでは、「摩擦、摩耗」とは機械的な接触界面での原子レベルの変形・破壊と熱の散逸であると考えられる。

第2章 温度を考慮した鉄単結晶変形の分子動力学シミュレーション

本章では、3章以降で用いる解析手法としては、基本的には非平衡な現象とみなせる原子レベルの摩擦・摩耗に対し、従来から用いられていた平衡系解析手法である Nose-Hoover 方法に代わるものとして、系の非平衡な状態をできるだけ忠実に再現するため、個々の原子の運動方程式を純粋に解く手法を開発した。本計算手法の有効性を示すため、対象としては α -鉄の単結晶の引張変形を選び、系の温度分布と時間に着目しながら脆性-延性遷移のシミュレーションを行った。脆性の計算には原子の速度をコントロールするスケリング法を用い、延性計算には原子の運動方程式を純粋に解く手法を用いた。計算結果より、温度変化による脆性-延性遷移を再現できることが明らかになり、本手法の妥当性が確認できた。

第3章 動摩擦現象の分子動力学シミュレーション

本章では、摩擦発生メカニズムの重要な要因である熱の散逸効果（いわゆる Tomlinson の理論）を把握するため、摩擦をともしない摩擦現象を解析する。ここでは、金属単結晶（ α -鉄）同士が接触する摩擦モデルを考え、分子動力学の手法を用いて、平面接触している二物体が高速で摺動している場合の物体の重心運動の減衰率から動摩擦力を求めると共に、弾性変形接触条件で接触界面の斥力のみを原子間ポテンシャル凹凸や荷重、系の温度が摩擦の発生にどのような影響を及ぼすかを調べた。斥力のみを原子間ポテンシャルを用いた理由は、引力を無視することで荷重の寄与を浮彫りにすると共に、界面の相互作用の影響を小さくし、弾性変形接触条件でスムーズにすべらせるためである。その結果、高速すべり状態では、非可逆的な熱の散逸による摩擦力が生じることを見だし、ポテンシャル凹凸や系の温度が現象に大きく寄与していることが分かった。特に、ポテンシャルの変化分とそこから生じる熱の散逸による温度の変化が、ほぼ正の相関関係にあることが明らかとなった。また、ポテンシャル凹凸が滑らかな場合には摩擦係数は荷重に依存しないが、凹凸が細かく存在する時には荷重と共に増加する傾向を示した。これらの結果は、たとえ摩擦面の引力に起因する凝着力を低減し摩擦を抑制しようとしても、高速すべりでは熱の散逸による摩擦が避けられないことを意味するものであると考えられる。

第4章 薄膜を有する金属面における摩擦・摩耗現象の分子動力学シミュレーション

本章では、第3章で述べた摩擦とは異なり、摩耗をともしない摩擦、すなわち、実際の摩擦面での熱の散逸とともに微小な破壊と変形が支配的である摩擦・摩耗を調べるため、金属上に形成された原子オーダーの厚みの薄膜と原子レベルの金属突起（pin）との接触における摩擦・摩耗の挙動を分子動力学を用いてシミュレーションを行い、金属と薄膜の間の相互作用の違いに着目しそれによって摩擦・摩耗形態がどのように変化するかを調べた。なお、この薄膜は、何らかの形で存在する金属面の汚れやコーティングを模擬している。その結果、従来の真実接触部マクロモデルが原子レベルでもある程度成り立つことを明らかにした。また、微小荷重の領域で界面の相互作用力が小さい時、ゼロ摩耗に近い状態があることも分かった。この場合、原子スケールの摩耗発生は、摩擦表面を擦っている金属突起前方の摩擦表面からの原子の飛び出しである可能性を見いだした。さらに、別の計算モデルとして、金属突起の原子の変位を固定したアプレッシブな摩耗計算により、摩耗が発生する荷重と膜の原子結合力の関係を調べた。その結果、摩耗が発生する荷重と膜の原子結合力を表す2体原子間ポテンシャル深さとの間にはほぼ比例関係が成り立ち、これは2体原子間の最大力と荷重との関係も意味することが分かった。

第5章 摩擦界面における原子スケール変形・破壊挙動の分子動力学解析

本章では、ナノメータオーダーの潤滑剤や汚れ、酸化膜等が介在する実際の摩擦面での原子レベル摩擦・摩耗をさらに詳細に調べるため、薄膜をサンドイッチした金属界面の摩擦モデルを考え、界面での原子レベル破壊・変形形態を詳細

に調べた。ここでは、膜の移動性を表すパラメータとして、各膜原子の平均 2 乗距離を時間で割った拡散係数と同じ次元の値を摩擦面と平衡な各層ごとに設定した。その結果、荷重や薄膜原子間結合力の変化による薄膜の構造変化が金属界面バルクの破壊・変形に大きく影響を及ぼすことがわかった。たとえば、バルク内の変形・破壊が顕著なのは、薄膜原子の結合力増加により膜が層状に移動しにくくなる場合と、逆に結合力の減少によりバルクと膜の界面で不規則なクラスタを形成する場合に多く見られた。また、バルクや薄膜内の数か所で原子間すべりなどが発生する過程を現象論的に捉えることで、バルクの破壊-変形の結果として現れる摩擦係数の温度依存性が、平均的に現象論的アーレニウスモデルで記述できるという非常に興味深い傾向が明らかになった。この結果は、ミクロ摩擦モデルを構築する上で貴重な指針となる。

第 6 章 微小き裂が存在する摩擦界面における摩擦の分子動力学解析

本章では、視点を変え、バルクに欠陥がある場合を想定し、金属界面バルク内にき裂が存在する場合の摩擦・摩擦における破壊・変形形態を第 4 章と同様にモデルを用いて解析し、き裂の有無が破壊・変形形態に及ぼす影響を調べた。ここでは、原子配列の乱れをあらわすパラメータとして、pin が金属表面を摺動することにより排除される原子の幅を考えた。その結果、摩擦面の原子配列の乱れがき裂の有無に大きく左右されることを見いだした。また、pin によって排除される幅は原子間結合力の影響をあまり受けないことも明らかになった。さらに、pin の原子配列と金属界面原子配列の組合せにより、摩擦状態は微妙に変化する傾向にあり、組合せを調整することで発生する摩擦を低減できる可能性のあることを見いだした。

第 7 章 総 括

本研究は、原子スケールの摩擦・摩擦現象において、従来、研究がなされていなかった。(1) マクロモデルとの対比、(2) 変形・破壊過程の詳細な分析、(3) 熱の散逸による摩擦発生メカニズム、(4) 温度依存による現象の統一的解釈、を分子動力学シミュレーションによる計算機実験により調べ、解明したものである。本章では、得られた主な結果を総括した。

得られた結果は、原子スケールでのトライポイントフェースの設計に必要不可欠ないくつかの新しい知見を示しており、摩擦を制御するための定性的な手法を示唆している。さらに、これらは実時間・実スケールのメゾスコピック摩擦モデルを構築する研究においても貴重な指標となり得るものと思われる。

審 査 結 果 の 要 旨

最近、真実接触部における摩擦・摩耗現象を解明し、ひいては摩擦・摩耗を軽減する有効な対策を打ち出すために、分子動力学的手法によるマイクロトライボロジーの研究が行われるようになった。本論文は、金属単結晶どうしまたは薄膜の介在する真実接触部における摩擦・摩耗を原子レベルでシミュレーションし、各種パラメータの影響を明らかにしたもので、全編7章よりなる。

第1章は序論である。

第2章では、以下の各章で固体の変形と破壊を原子レベルでシミュレーションするために開発した、一つの分子動力学的手法の妥当性を検証している。すなわち、 α 鉄単結晶の試験片の引張り問題を、個々の原子の運動方程式を隔的に積分することによって解き、温度が上昇した状態では試験片の変形は延性的であり、温度上昇を抑えた場合には脆性的になることなど、この手法により妥当な結果の得られることを示している。

第3章では、二つの α 鉄の単結晶が弾性接触の条件のもとで高速に摺動している場合の動摩擦現象を、界面上に斥力のみで原子間ポテンシャルを仮定し、分子動力学的手法でシミュレーションしている。その結果、熱の非可逆的散逸により摩擦力が生じること、また動摩擦係数に及ぼす荷重、ポテンシャルコア半径、摩擦面温度の影響の仕方が明らかにされている。

第4章では、 α 鉄上の数原子の厚みの被膜の上を、 α 鉄のピンが高速で滑る場合の摩擦・摩耗現象を、分子動力学的手法でシミュレーションしている。荷重の増加とともに摩擦が激しくなる状態でも、摩擦係数がほぼ一定であること、すなわち微小突起摩擦モデルの妥当性を裏付けるものであること、また薄膜の摩擦に及ぼす α 鉄と薄膜それぞれの原子間結合力、滑り速度などの効果を明らかにしている。

第5章では、 α 鉄の摺動界面に数原子の厚みを持つ薄膜が介在する場合の摩擦・摩耗現象を分子動力学的手法でシミュレーションしている。 α 鉄の変形破壊が α 鉄、 α 鉄と薄膜、薄膜のそれぞれの原子間結合力、膜厚、摩擦面温度などに複雑に関係すること、摩擦係数と温度の関係が膜原子間結合力によって変わる様子などを明らかにしている。

第6章では、第4章の問題で、薄膜表面に原子オーダーのき裂が存在する場合を論じている。微細き裂が摩擦に大きな影響を持つことを示している。

第4章は総括である。

以上要するに本論文は、真実接触部における摩擦・摩耗現象に関し、分子動力学的手法を用い、多くの場合のシミュレーションを行い、その現象解明に有益な示唆を得たもので、機械工学とりわけトライボロジーの発展に寄与するところが少なくない。

よって、本論文は博士（工学）の学位論文として合格と認める。